数理解析研究所講究録
125巻 1971年 1-6

格子ソリトン

東教大 光研　戸田盛和

§1. Introduction

格子ソリトンの考察において，格子よりも簡単と思われる連続体の非線型媒質を振り返ってみる必要がしばしばある。そこで少し歴史的に連続体の場合から始めて格子にいたる非線型波の取扱いを述べてみたい。

§2. KdV方程式

Korteweg と de Vries とは small but finite amplitude の shallow water wave を扱って KdV 方程式を導き，その解として一個のソリトン（そういう名称はまだなかったが）の解とつらなり波（cnoidal wave）を得て，また後者の微少な変形を研究している。これは1895年のことである。

Gardner と Morikawa (1960) は磁場 B が存在するときの hydromagnetic wave in a cold plasma が

KdV方程式で表わされることを示した。格子波も連続体近似でこの方程式に帰せられる(Zabusky, 1963)。KdV方程式の再帰現象はZabuskyとKruskalによって発見され(1965)、ソリトンの運動という観点から解釈された。ソリトン自身の相互作用(衝突・通過)は1967年に計算機実験によって示された。プラズマ波のソリトンはIkezi等によって実験的に示された(1970)。浅い水の波によってKdVの解を調べることもなされた(1970, Zabusky等)。

非線型の格子振動に対してFermi-Pasta-Ulamの研究がある(1955)。F-P-Uは一次元の非線型格子の振動が熱平衡に近づくであろうという予想の下に計算機実験を行ったが、予期に反して再帰現象を発見した。この研究はJackson, Ford, Zabusky, Saito等によって受けつがれた。このような振動系は不安定になるだろうというIzrailevとChirikov(1966)の提唱もある。Visscher等は格子振動による熱伝導の研究から非線型格子およびこれに不純物を入れたときの振動を計算機により調べ(主に2次元格子)、16mmフィルムに収めた(1967)。これらの仕事では、非線型のポテンシャルを $\phi(r)=\frac{\kappa}{2}r^2+\frac{\alpha}{3}r^3+\frac{\beta}{4}r^4+\cdots$ のように展開した2項、あるいは3項までをとって計算している。Todaは $\phi(r)=\frac{a}{b}(e^{-br}-1)+ar$ (exp-格子)を用いて非線型1次元格子を調

べている。Hirota-Suzukiは非線型キャパシタンスをもつLC-ladder回路によって非線型波の伝播を眼に見えるようにした。

Taniuchi等はion-acoustic wave in plasmaがKdVで表わされることを示した(1966)。また、Taniuchi・Yazimaは非線型Schrödinger方程式 $i\psi_t = \mu\psi_{xx} + |\psi|^2\psi$ の性質を研究している。Varma等は結晶中のheat pulseの非線型の伝播がこの方程式で表わされることを示した(1970).

§3. 種々の方程式間の関係

非線型格子から出発して、KdV, nonlinear Schrödinger等の方程式を導くことにより、これらの間の関係を調べよう。

格子においてバネのポテンシャルを

$$\phi(r) = \frac{\kappa}{2}r^2 + \frac{\kappa\alpha}{p+2}r^{p+2}$$

とすると格子の運動方程式は

$$\omega_0^{-2}\ddot{y}_n = (y_{n+1}-2y_n+y_{n-1}) + \alpha\left[(y_{n+1}-y_n)^{p+1}-(y_n-y_{n-1})^{p+1}\right]$$

と書ける。$\omega_0=\sqrt{\kappa/m}$. $p=1$ とし h を格子間隔(バネの長さの平均), $x=nh+ct$, $c=h\sqrt{\kappa/m}$, $\varepsilon=2\alpha h$ とおくと連続体近似として

$$\alpha\left[(y_{n+1}-y_n)^2-(y_n-y_{n-1})^2\right]=\varepsilon h^2 y_x y_{xx}+O(h^5)$$

を得る．また $p=2$ とすると $\varepsilon'=2\alpha' h$ として

$$\alpha'\left[(y_{n+1}-y_n)^3-(y_n-y_{n-1})^3\right]=\frac{3}{2}\varepsilon' h^3 y_x^2 y_{xx}+O(h^6)$$

を得る．また，

$$y_{n+1}-2y_n+y_{n-1}=h^2\left(y_{xx}+\frac{h^2}{12}y_{xxxx}\right)$$

である。したがってポテンシャルが

$$\phi(r)=\frac{\kappa}{2}r^2+\frac{\kappa\alpha}{3}r^3+\frac{\kappa\alpha'}{4}r^4$$

のときは，

$$y_{tt}=c^2\left[(1+\epsilon P y_x+Q y_x^2)y_{xx}+\frac{h^2}{12}y_{xxxx}\right]$$

を得る．ここで $\epsilon P\equiv\varepsilon$，$Q\equiv\frac{3}{2}\varepsilon' h$ とおきなおした。$\epsilon P\gg Q$ とすれば KdV 方程式がこれから導かれるのであるが，$\varepsilon=2\alpha h$ の小さい場合も考えて，このようにおく．実際の結晶で Q が ϵP に比べて大きいものがあるということである。

$$\xi=\epsilon(x-ct)/h,\quad \tau=\epsilon^3 ct/h,\quad u/h=aw$$

とおけば ϵ^4 の項をそろえて

$$W_\tau + \frac{1}{2}(PaW + Qa^2W^2)W_\xi + \frac{1}{24}W_{\xi\xi\xi} = O(\epsilon^2)$$

を得る．したがって $Q=0$ とおけば KdV，$P=0$ とおけば modified KdV を得る．

さらに $\quad \eta = a(\xi + \frac{3}{24}k_0^2\tau), \quad s = a^2\tau,$

$$\begin{aligned} W &= \psi^{(1)} e^{i(k_0\xi - \omega_0\tau)} + c.c. \\ &+ a[\psi^{(0)} + \psi^{(2)} e^{2i(k_0\xi - \omega_0\tau)} + c.c.] \\ &+ a^2[\psi^{(3)} e^{3i(k_0\xi - \omega_0\tau)} + c.c.] + O(a^3) \end{aligned}$$

とおき，a のべきでそろえる．

$a^0 e^{i(k_0\xi - \omega_0\tau)}$ の項から $\quad \omega_0 + \frac{k_0^3}{24} = 0$

a^1 の項から $\quad \psi_s^{(0)} = 0$

a^2 の項から $\quad \frac{3}{24}k_0^2 \cdot \psi_\eta^{(0)} + \frac{P}{2}[\psi^{(1)}\psi_\eta^{(1)*} + \psi_\eta^{(1)}\psi^{(1)*}] = 0.$

これから

$$\psi^{(0)} = -P\frac{4}{k_0^2}|\psi^{(1)}|^2$$

$a^2 e^{i(k_0\xi - \omega_0\tau)}$ の項から

$$i\psi_s^{(1)} = \frac{3k_0}{24}\psi_{\eta\eta}^{(1)} + \frac{k_0}{2}(Q|\psi^{(1)}|^2\psi^{(1)} + P\psi^{(0)}\psi^{(1)}) = O(a)$$

あるいは nonlinear Schrödinger 方程式を得る：

$$i\psi_s^{(1)} = \frac{k_0}{8}\psi_{\eta\eta}^{(1)} + \frac{k_0}{2}\left(Q - \frac{4}{k_0^2}P^2\right)|\psi^{(1)}|^2\psi^{(1)} = 0$$

(Tappert-Varma と少し係数がちがう)．

§4. 結び.

定性的には次のようにいえるであろう：

格子振動で，波がなめらかであれば，連続体の式

$$y_{tt} = c^2\left[(1+\beta y_x + \beta' y_x^2)\, y_{xx} + \frac{h^2}{12} y_{xxxx}\right]$$

が導かれる。β, β' は相互作用の非線型項の形に依存する。

(i) $\beta \gg \beta'$ の場合，格子はKdVと同様である。また，

$$i\psi_\tau = \psi_{\eta\eta} - |\psi|^2\psi$$

と同様である，ふつうのソリトン（classical soliton）が存在する。

(ii) $\beta' \gg \beta$ の場合，nonlinear Schrödinger 方程式

$$i\psi_\tau = \psi_{\eta\eta} + |\psi|^2\psi$$

と同様で，搬送波の波長λが十分小さく，パルスが十分強ければ，自己集束（self-trapping, self-focusing）が起こって，安定なEnvelope－ソリトンが生じる。

以上述べたことはconjectureも含むので，今後，成立条件など吟味する必要がある。